

# Кинетический фазовый переход полупроводник–металл в почти магнитных полупроводниках на примере моносилицида железа

© А.Г. Волков, А.Г. Андреева, О.В. Аношина, А.А. Повзнер

Уральский государственный технический университет,  
620002 Екатеринбург, Россия  
E-mail: povz@kf.ustu.ru

(Поступила в Редакцию 27 ноября 2001 г.  
В окончательной редакции 1 апреля 2002 г.)

На примере моносилицида железа исследуется возможность кинетического фазового превращения полупроводник–металл в почти магнитных полупроводниках. Показано, что выделение тепла вследствие протекания тока обуславливает рост амплитуды спиновых флуктуаций и расщепление ими электронных спектров, что в свою очередь ведет к схлопыванию энергетической щели и лавинообразному увеличению числа носителей тока.

Известно, что в достаточно сильных электрических полях наблюдаются  $S$ -образные нелинейности вольт-амперных характеристик (ВАХ) полупроводников [1,2]. Такие  $S$ -образные ВАХ можно трактовать как реализацию кинетического фазового перехода „холодный“–„горячий“ полупроводник [3].

Особенности ВАХ полупроводниковых материалов в условиях динамического равновесия, когда выделяемое вследствие протекания тока джоулево тепло не успевает отводиться в окружающую среду из-за малого значения теплопроводности, были рассмотрены в работе [1]. При этом было установлено, что ВАХ образца, представляющего собой пленку квадратного сечения шириной  $L$ , толщиной и высотой  $h$ , должна иметь  $S$ -образный характер. Однако результаты данной работы применимы только к классическим полупроводникам, ширина запрещенной зоны, электронный спектр и состояние электронной подсистемы которых остаются неизменными.

В то же время среди соединений на основе силицидов  $d$ -металлов можно выделить особый класс суперпарамагнитных полупроводников ( $\text{FeSi}$ ,  $\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}\text{Si}$ ,  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{Si}$  и др.), в формировании электронных свойств которых решающую роль играют флуктуации спиновой плотности [4–8]. При этом спиновые флуктуации, амплитуда которых возрастает с ростом температуры, расщепляют исходный одноэлектронный спектр на две ветви (см., например, [4–8])

$$\varepsilon_k^{(\pm)} = \varepsilon_k \pm \xi, \quad (1)$$

одна из которых (с ростом амплитуды спиновых флуктуаций  $\xi$ ) смещается вверх, а другая — вниз по шкале энергий. Такая перенормировка приводит к „схлопыванию“ энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости, обуславливая переход полупроводник–металл с повышением температуры.

Наиболее подробно анализ подобных электронных превращений проведен для суперпарамагнитного полупроводника  $\text{FeSi}$  [9–11]. Однако неравновесные особенности этого превращения, которые в подобной системе должны усиливаться по сравнению с обычными немагнитными полупроводниками, а также возможные нелинейные особенности ВАХ рассмотрены не были.

Согласно [6–8], величина амплитуды спиновых флуктуаций в суперпарамагнитных системах определяется соотношением

$$\xi = bT'D_0^{-1/2}(D_0^{-1} + a)^{-1/2}, \quad (2)$$

где коэффициенты  $a$  и  $b$  определяются либо из анализа нейтронографических данных, либо из данных магнитных измерений (см. [6–8]),  $D_0(=D_0(\xi, T'))$  — фактор обменного усиления однородной магнитной восприимчивости  $d$ -электронов (см. [6–8]),  $T'$  — внутренняя температура образца, зависящая от плотности тока  $j$  и приложенного напряжения  $U$ , а также определяемая условием динамического равновесия

$$jU = \frac{2}{h}\lambda(T' - T), \quad (3)$$

где  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности полупроводника, постоянный по всей толщине образца,  $T$  — температура окружающей среды.

Таким образом, в условиях динамического равновесия (3) амплитуда спиновых флуктуаций становится зависящей от приложенного напряжения и плотности тока, текущего по образцу

$$\xi = b \left( T + jU \frac{h}{2\lambda} \right) D_0^{-1/2} (D_0^{-1} + a)^{-1/2}. \quad (4)$$

Соотношение (4) в соответствии с (1) ведет к трансформации электронного спектра при изменении  $U$  и  $j$ , а также к зависимостям от напряжения и плотности тока других физических величин (в частности,  $D_0$ , химического потенциала  $\mu$ , плотности электронных состояний, ширины запрещенной зоны  $E_g$  и т.д.). При этом в отличие от обычных полупроводников влияние напряжения и плотности тока на свойства почти магнитных полупроводников оказывается значительно усиленным из-за большой величины фактора обменного усиления.

Для самосогласованного описания проводимости суперпарамагнитных полупроводниковых соединений воспользуемся определением плотности тока, записанным в обобщенной  $sd$ -модели с учетом спин-флуктуационной

перенормировки электронного спектра [4–8],

$$j = \sum_{l,\alpha} j_{l,\alpha}, \quad (5)$$

$$j_{l,\alpha} = e \int v_{k,l} f(\varepsilon_{k,l} - \alpha \xi_l - \mu - eU v_{k,l} \tau_{k,l}/L) d\mathbf{k}, \quad (6)$$

где  $j_{l,\alpha}$  — плотности тока каждой из групп ( $\alpha = \pm 1$ )  $sp$ - ( $l = s$ ) или  $d$ - ( $l = d$ ) электронов,  $\varepsilon_{k,l}$  — энергия электронов с квазиимпульсом  $k$ ,  $v_{k,l}$  — проекция скорости электронов на направление электрического поля,

$$\tau_{k,l} \propto k^{2r-1} (\partial \varepsilon_{k,l} / \partial k)^2 \quad (7)$$

— время релаксации,  $r$  — параметр, равный 3/2 в случае рассеяния электронов на фононах;  $\xi_l$  — величина спин-флуктуационного расщепления энергетического спектра  $sp$ - или  $d$ -электронов, выражающаяся через амплитуду спиновых флуктуаций в  $d$ -подсистеме

$$\xi_d = \xi,$$

$$\xi_s = (J/Q)^2 \xi;$$

$\mu$  — химический потенциал, определяемый из условий электронейтральности с перенормированными плотностями состояний

$$N/N_0 = (1/2) \sum_{\alpha=\pm 1, l=s, d} \int_{-\infty}^{\infty} g_0^{(l)}(\varepsilon + \alpha \xi_l) f(\varepsilon - \mu) d\varepsilon; \quad (8)$$

$f(\varepsilon - \mu)$  — функция Ферми–Дирака, зависящая от внутренней температуры  $T'$ ;  $g_0^{(l)}(\varepsilon)$  — плотность состояний невзаимодействующих  $sp$ - или  $d$ -электронов,  $Q$  — параметр внутриатомного кулоновского отталкивания  $d$ -электронов,  $J$  — однородная часть параметра  $sp$ ,  $d$ -обменного взаимодействия,  $N_0$  — число узлов кристаллической решетки,  $N$  — общее число  $sp$ - и  $d$ -электронов,  $e$  — заряд электрона.

Система уравнений (3)–(8) позволяет описать ВАХ суперпарамагнитных полупроводников, находящихся в условиях саморазогрева. При этом, как следует из (1) и (4), этот эффект будет дополнительно усиливаться сужением энергетической щели в спектре таких полупроводников. Однако аналитическое решение этой системы уравнений в общем случае невозможно. Поэтому анализ уравнений (3)–(8) и оценка критических значений напряжения были выполнены нами численно на примере FeSi.

Согласно данным зонных расчетов [12], одноэлектронный спектр как  $d$ -, так и  $sp$ -электронов FeSi состоит из двух зон, разделенных областью запрещенных энергий шириной примерно 0.12 eV (рис. 1). Химический потенциал этого соединения при  $T = 0$  К располагается в энергетической щели, поэтому одноэлектронное состояние FeSi является полупроводниковым. Однако, как было установлено в [13], рост температуры ведет к сужению запрещенной зоны как в спектре  $sp$ -, так и  $d$ -электронов этого соединения. Причем при  $T_g^{(d)} \approx 100$  К энергетическая щель в спектре  $d$ -электронов исчезает и их состояние металлизуется.

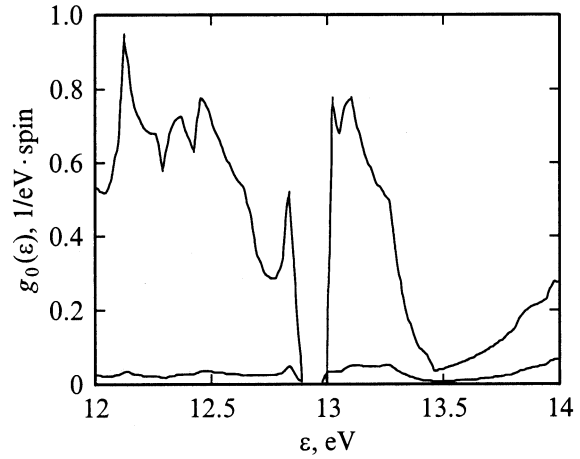


Рис. 1. Плотность электронных состояний FeSi [12]. Верхняя кривая соответствует  $d$ -электронам, нижняя —  $sp$ -электронам.

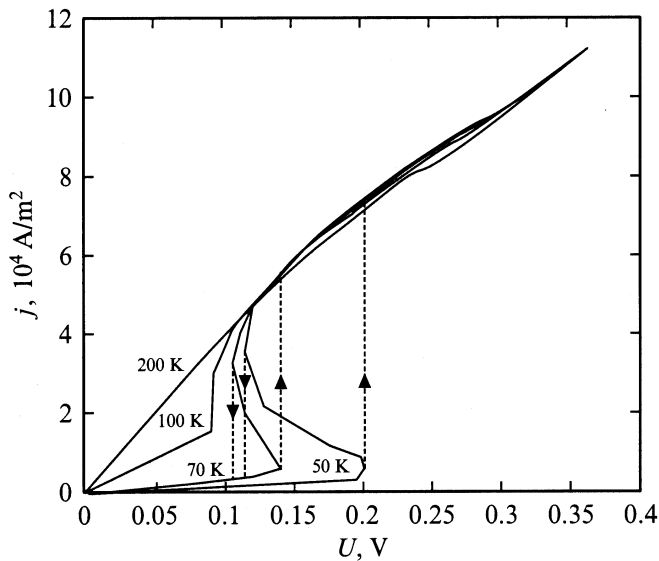
В свою очередь химический потенциал (из-за несимметричности  $d$ -зон) начинает смещаться влево по шкале энергий и при  $T^{(s)} \approx 200$  К попадает в валентную зону  $sp$ -электронов, вследствие чего состояние последних также становится металлическим. Таким образом, при внутренних температурах образца ниже 100 К проводимость моносилцида железа формируется только за счет активационного механизма, в интервале от 100 до 200 К — металлического и активационного одновременно, а выше 200 К — только металлического.

Результаты численных расчетов ВАХ кубического ( $L = h$ ) образца FeSi представлены на рис. 2. Используемая при этом функция плотности электронных состояний взята из работы [12] (рис. 1). Электронные  $d$ - и  $sp$ -спектры моделировались на основе этой плотности состояний в приближении эффективной массы

$$g^{(l)}(\varepsilon_{k,l}) = k^2 (\partial \varepsilon_{k,l} / \partial k)^{-1},$$

а для вычисления амплитуд спиновых флуктуаций использовались значения спин-флуктуационных параметров  $a = 0$  и  $b = 10/Q$ , найденные в [4] из анализа нейтронографических данных. Значение  $sp$ ,  $d$ -обмена было выбрано, как и в [13],  $J \approx 0.1Q$ . Температурная зависимость коэффициента теплопроводности FeSi описывалась функцией, построенной путем интерполяции экспериментальных данных, приведенных в работе [14].

Из приведенных вольт-амперных характеристик и численного анализа зависимости внутренней температуры образца от приложенного напряжения следует, что независимо от размеров образца значение напряжения перехода в „горячую“ фазу ( $U_{on}$ ) соответствует разогреву образца до температуры, близкой к  $T' = T_g^{(d)}$  ( $= 100$  К), при которой происходит металлизация  $d$ -электронной подсистемы (рис. 2). После этого внутреннего температура испытывает скачкообразное изменение до значения  $T'$ , зависящего от размеров образца и значения температуры окружающей среды, но обязательно большего  $T^{(s)}$  ( $= 200$  К). В то же время при обратном ходе



**Рис. 2.** Вольт-амперные характеристики почти магнитного полупроводника FeSi. Над кривыми указаны соответствующие им значения температуры окружающей среды.

ВАХ, значение напряжения перехода в „холодную“ фазу ( $U_{\text{off}}$ ) соответствует понижению внутренней температуры до значения  $T^{(s)}$  (при котором реализуется переход  $sp$ -электронов из металлического в полупроводниковое состояние). При этом внутренняя температура образца понижается скачком до значений, меньших  $T_g^{(d)}$  (рис. 2). Также следует отметить и тот факт, что гистерезис ВАХ становится невозможным при температурах окружающей среды  $T > T_g^{(d)}$  ( $= 100$  K), т.е. в тех случаях, когда состояние  $d$ -электронов изначально является металлическим (рис. 2). При этом нелинейное изменение ВАХ сохраняется вплоть до полной металлизации всей электронной подсистемы, т.е. до  $T = T^{(s)}$ .

Таким образом, рассмотренный кинетический фазовый переход обусловлен тем, что при  $U = U_{\text{on}}$ , вследствие выделения джоулева тепла тепловые спиновые флуктуации приводят к схлопыванию энергетической щели в спектре  $d$ -электронов, обуславливая тем самым увеличение числа носителей тока и, как следствие, значительное возрастание плотности тока. Увеличение плотности тока ведет к еще большему выделению джоулева тепла (саморазогреву образца) и тем самым к еще большему увеличению числа носителей тока (из числа  $d$ -электронов) и плотности тока. Этот процесс носит лавинообразный характер и заканчивается тогда, когда химический потенциал оказывается в валентной зоне  $sp$ -электронов и состояние последних металлизуется. Таким образом, при  $U = U_{\text{on}}$  вся электронная подсистема суперпарамагнитного полупроводника скачком металлизуется. Дальнейшее же повышение внутренней температуры образца ведет к увеличению его сопротивления и тем самым к уменьшению величины плотности тока и выделяемого джоулева тепла. При этом лавинообразный процесс „саморазогрева“ прекращается и возникает устойчивая „горячая“ фаза.

Аналогично при обратном ходе ВАХ уменьшение приложенного напряжения ведет к уменьшению плотности тока и уменьшению выделяемого джоулева тепла. Вследствие этого амплитуда спиновых флуктуаций убывает, что уменьшает спин-флуктуационное расщепление электронного спектра, смещает химический потенциал к краю валентной зоны  $sp$ -электронов и выводит последний в область запрещенных (при  $T' \leq T^{(s)}$ ) для  $sp$ -электронов энергий. Вызванное этим уменьшение числа носителей тока еще больше ослабляет процесс выделения тепла и обуславливает исчезновение спин-флуктуационных перенормировок энергетической щели в спектре  $d$ -электронов (при  $T' = T_g^{(d)}$ ).

Рассмотренные эффекты кинетических электронных превращений в суперпарамагнитном FeSi требуют дополнительных экспериментальных исследований его проводимости в достаточно сильных электрических полях. Другой группой веществ, в которых также возможны рассмотренные кинетические электронные переходы, по-видимому, являются Кондо-системы на основе соединений редкоземельных металлов (например, GeNiSn, CeBi<sub>4</sub>Pt, SmB<sub>6</sub>), для которых наблюдаются аномалии электронных свойств, во многом аналогичные наблюдаемым в моносилициде железа [15].

## Список литературы

- [1] В.Л. Бонч-Бруевич, И.П. Звягин, А.Г. Миронов. Доменная электрическая неустойчивость в полупроводниках. Наука, М. (1972). 416 с.
- [2] А. Кроткус, З. Добровольский. Электропроводность узкощелевых полупроводников. Мокслас, Вильнюс (1988). 172 с.
- [3] А.В. Мелких, А.А. Повзнер, А.Г. Андреева, И.Н. Сачков. Письма в ЖТФ **27**, 6, 19 (2001).
- [4] А.А. Повзнер, А.Г. Волков, П.В. Баянкин. ФНТ **23**, 10, 1054 (1997).
- [5] П.В. Гельд, А.А. Повзнер, А.Г. Волков. ДАН СССР **283**, 2, 358 (1985).
- [6] А.А. Повзнер, А.Г. Волков, П.В. Баянкин. **40**, 8, 1427 (1998).
- [7] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. Мир, М. (1988). 288 с.
- [8] А.А. Повзнер, А.Г. Волков, П.В. Баянкин. ФНТ **23**, 6, 1054 (1997).
- [9] V. Jaccarino, G.R. Wertheim, J.H. Werneic, L.R. Walker, S. Arrays. Phys. Rev. **160**, 3, 46 (1967).
- [10] Z. Schleizenger, Z. Fisk, H.T. Zhang, M.B. Maple, J.F. Di-Tusa, G. Aeppli. Phys. Rev. Lett. **71**, 11, 1748 (1993).
- [11] Ф.А. Сидоренко, Е.А. Дмитриев, П.В. Гельд. Изв. вузов. Физика **8**, 1, 15 (1972).
- [12] Л.И. Винокурова, А.В. Власов, Э.Т. Кулатов. Труды ИОФАН **2**, 4, 463 (1991).
- [13] А.Г. Волков, А.А. Повзнер, В.В. Крюк, П.В. Баянкин. ФТТ **41**, 10, 1792 (1999).
- [14] Ф.М. Островский. Автореф. дисс. УПИ, Свердловск (1970).
- [15] M.B. Hunt, M.A. Chernikov, E. Felder, H.R. Ott, Z. Fisk, P. Canfield. Phys. Rev. **B50**, 20, 14933 (1994).